Chapitre 5

Intégration et dérivation numérique

5.1 Introduction

5.1.1 Objectif

Le but est l'évaluation numérique de l'intégrale définie d'une fonction. Lorsque l'intégrale de la fonction f n'est pas calculable (par exemple $\int_0^1 e^{-x^2}dx$) on verra que l'on peut l'approximer de diverses façons. Des fois même, connaissant la primitive F de f il est plus pratique d'utiliser ces méthodes d'approximation que de procèder à une évalution directe en fonction de F.
Dans ce chapitre, nous allons présenter la principe général du calcul approché d'intégrale que nous appliquons dans le cas de la méthode des rectangles, trapèzes et Simpson. Nous présentons aussi la théorie des formules de quadrature. La dernière partie sera consacrée a la dérivation numérique.

5.1.2 Rappels:

i. Si f est continue sur $[a,b]$, alors f admet une primitive donc $\int_\alpha^\beta f(t)dt$ existe pour tous $\alpha, \beta \in [a,b]$.

ii. Soient $f :]a,b[\to \mathbb{R}$ et F: $[a,b] \to \mathbb{R}$: F est une primitive de f sur $[a,b]$ si F est continue sur $[a,b]$, si F est dérivable sur $]a,b[$ alors $F'(x) = f(x)$, quelque soit $x \in]a,b[$.

iii. Si F est une primitive de f alors $G = F + cte$ est aussi une primitive de f.

vi. $\alpha, \beta \in [a,b]$, si F et G sont deux primitives de f on a:

$$I = F(\beta) - F(\alpha) = G(\beta) - G(\alpha)$$

I est indépendant de F et ne dépend que de α, β et f.

vii. - $\alpha, \beta \quad \in [a,b]$, si F et G sont deux primitives de f on a:

$$I = F(\beta) - F(\alpha) = G(\beta) - G(\alpha) = \int_\alpha^\beta f(t)dt$$

I est indépendant de F et ne dépend que de α, β et f

viii. Si $t \in [a,b]$, la fonction F de $[a,b]$ dans $\mathbb{R}$ définie par $F(t) = \int_\alpha^t f(x)dx$ est une primitive de f: telle que $F(\alpha) = 0$ et $F'(t) = f(t)$ pour tout $t \in [a,b]$.

5.1.3 Intérpretation géomètrique de l'intégrale

Soit une fonction numérique f: $[a,b] \to \mathbb{R}$ continue,

a. si $f \geq 0$ sur $[a,b]$, $\int_a^b f(t)dt$ est la surface hachurée de la figure qui suit:

b. Si f change de signe sur $[a,b]$, dans ce cas on considèrera la somme algébrique.

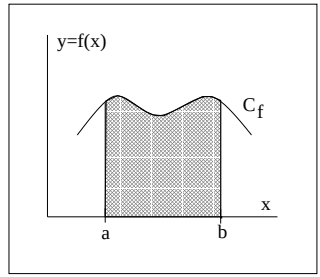

Figure 5.1: f de signe constant

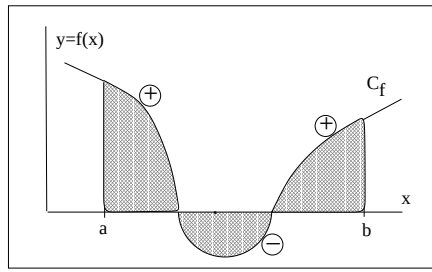

Figure 5.2: f change de signe.

5.1.4 Principe du calcul approché:

l'interprétation géométrique de l'intégrale suggère de décomposer la surface sous le graphe de la fonction en éléments d'aires simples (réctangles, triangles, trapèzes ...) moyennant certaines approximations au voisinage de la courbe.

L'idée est donc de subdiviser le segment $[a, b]$ en plusieurs sous–segments $[a_i, a_{i+1}]$ $(i = 0, \ldots, n-1, a_0 = a, a_n = b)$.

$$\int_a^b f(t)dt = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{a_i}^{a_{i+1}} f(t)dt$$

on est donc ramené à évaluer $\int_{a_i}^{a_{i+1}} f(t)dt$ sur un petit segment $[a_i, a_{i+1}]$ où f ne varie pas trop.

Ce qui nous amène à proposer la formule approximative suivante sur un petit intervalle $[\alpha, \beta]$ de $[a, b]$:

$$\int_\alpha^\beta f(t)dt = I_{\alpha,\beta}(f) + R_{\alpha,\beta}(f) \tag{5.1}$$

$I_{\alpha,\beta}(f)$ est l'approximation proposée, $R_{\alpha,\beta}(f)$ est un reste: "erreur de méthode" (5.1) est dite formule simple ou élémentaire. la formule (5.1) appliquée sur chaque segment $[a_i, a_{i+1}]$ nous donne la formule approximative Composée:

$$\int_a^b f(t)dt = \sum_{i=0}^{n-1} I_{a_i,a_{i+1}}(f) + \sum_{i=0}^{n-1} R_{a_i,a_{i+1}}(f)$$

Dans tout ce qui suit nous considèrons la subdivision suivante:

$$a_i = a + ih;\ i = 0, \ldots,\ n,\ a_0 = a,\ a_i = a + ih,\ a_n = b \ \text{ avec } h = \frac{b-a}{n}$$

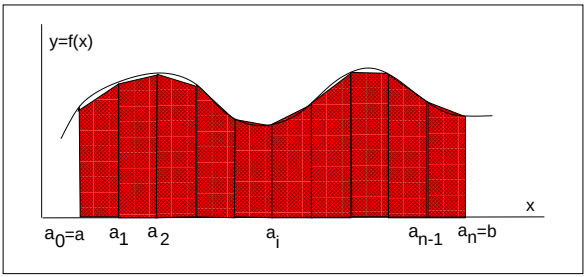

Figure 5.3: Subdivision de $[a, b]$ et approximation de $\int_a^b f(x)dx$ par la somme des surfaces hachurées.

cette subdivision est appelée la subdivision régulière de pas h

5.2 Formule des réctangles (avec point milieu):

5.2.1 Formule élémentaire:

On remplace le graphe de la fonction f entre $[\alpha, \beta]$ par une droite $y = f(\gamma)$, où $\gamma = \frac{\beta+\alpha}{2}$ est le point milieu de $[\alpha, \beta]$. (voir figure ci dessous)

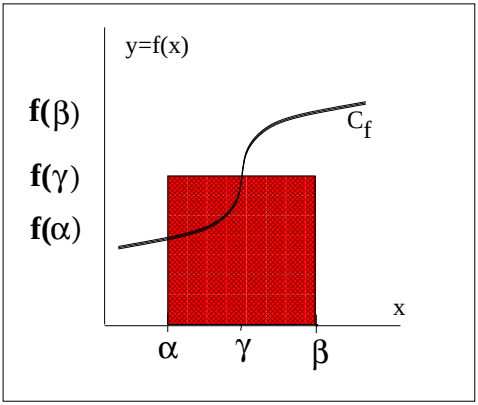

Figure 5.4: M]'ethode des réctagles avec point milieu.

$$\int_\alpha^\beta f(t)dt \approx hf(\gamma) + R_{\alpha,\beta}(f), \quad h = \beta - \alpha$$

Estimation du reste $R_{\alpha,\beta}(f)$:
Supposons que f a une dérivée seconde continue (F aura donc une dérivée tièrce continue). La fomule de Taylor à l'ordre 3 entre γ et β appliquée à F:

$$\begin{aligned} F(\beta) - F(\gamma) &= (\beta-\gamma)F'(\gamma) + \frac{1}{2}(\beta-\gamma)^2 F''(\gamma) + \frac{1}{3!}(\beta-\alpha)^3 F'''(\xi) \\ &= \frac{h}{2}f(\gamma) + \frac{h^2}{8}f'(\gamma) + \frac{h^3}{48}f''(\xi); \quad \xi \in [\beta, \gamma] \end{aligned} \tag{5.2}$$

Formule de Taylor entre α, γ:

$$F(\alpha) - F(\gamma) \quad = \quad -\frac{h}{2}f(\gamma) + \frac{h^2}{8}f'(\gamma) - \frac{h^3}{48}f''(\eta) \ \eta \in [\alpha, \gamma] \tag{5.3}$$

En retranchant (5.2) de (5.3) on obtient la relation:

$$F(\beta) - F(\alpha) = hf(\gamma) + \frac{h^3}{24}\frac{f''(\eta) + f''(\xi)}{2}$$

f'' est une fonction continue, d'après le théorème des valeurs intermédiaires il existe $\theta \in]\eta, \xi[$ telle que

$$\frac{1}{2}(f''(\eta) + f''(\xi)) = f''(\theta)$$

La formule d' élémentaire devient donc:

$$\int_\alpha^\beta f(t)dt = hf(\gamma) + \frac{h^3}{24}f''(\theta); \quad \alpha < \theta < \beta \tag{5.4}$$

5.2.2 Formule composée:

Supposons que: f: $[a, b] \to \mathbb{R}$ a une dérivée seconde f'' continue, considèrons la subdivision $(a_i)_{i=0,1,\ldots n}$ de pas $h = \frac{b-a}{n}$, sur chaque intervalle $[a_i, a_{i+1}]$ on a la formule élèmentaire:

$$\int_{a_i}^{a_{i+1}} f(t)dt = hf(\gamma_i) + \frac{h^3}{24}f''(\theta_i) \ ; \ a_i < \theta_i < a_{i+1} \ avec \ \gamma_i = \frac{a_i + a_{i+1}}{2}$$

d'ou la formule composée suivante:

$$\int_a^b f(t)dt = h\sum_{i=0}^{n-1} f(\gamma_i) + n\frac{h^3}{24}\sum_{i=0}^{n-1}\frac{1}{n}f''(\theta_i)$$

Or, f'' est continue, d'après le théorème des valeurs intermédiaires, il existe $\theta \in [a, b]$ tel que:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\theta_i) = f''(\theta)$$

en tenant compte du fait que $nh = (b - a)$, on obtient comme formule composée:

$$\int_a^b f(t)dt \quad = \quad \underbrace{h\sum_{i=0}^{i=n-1} f(\frac{a_i + a_{i+1}}{2})}_{Q_n(f)} \quad + \underbrace{\frac{h^2}{24}(b-a)f''(\theta)}_{R_n(f)}$$

graphiquement on a le schéma suivant:

5.2.3 Propriétés.

a. Si $f'' = 0$ sur $[a, b]$ c-à-d f est un polynôme de degré un ou moins, il n'y a pas d'erreur de méthode.

b. Si $f'' \geq 0$ l'approximation de $\int_a^b f(t)dt$ fournie par $Q_n(f)$ est par défaut.

c. La méthode est convergente, en effet si M est un majorant de $|f''|$ sur $[a, b]$ on a:

$$|R_n(f)| \leq \frac{h^2}{24}(b-a)M \text{ proportionnelle à } \frac{1}{n^2} \to 0$$

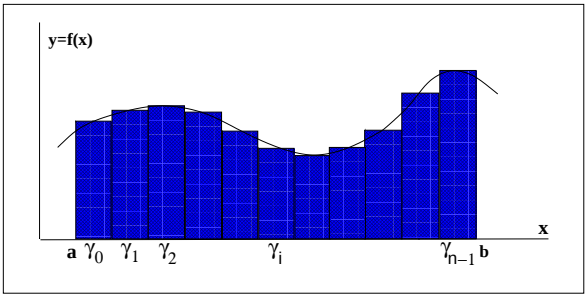

Figure 5.5: Méthode des réctangles avec point milieu

5.2.4 Estimation de l'erreur.

- si $f" \leq M$ sur $[a,b]$ on a une estimation à priori de l'erreur $\frac{h^2}{24}(b-a)M$
- si $f"$ n'est pas majorée on peut minimiser le nombre d'évaluations de f. On se limite souvent au cas où n est une puissance de 3 (n: 1,3,9,27,...). $|Q_n - Q_{3^n}|$ fournit en général une estimation de l'érreur.

5.2.5 Exemple

$Log2 = \int_1^2 \frac{dt}{t} \approx 0.6931471806$

$$f(x) = \frac{1}{x}, f'(x) = -\frac{1}{x^2}, f''(x) = \frac{2}{x^3}, |f''(x)| \leq 2 = M, \quad \forall x \geq 1$$

• Si $n = 1$ on a: $h = \frac{2-1}{1} = 1$, $a_0 = 1$, $a_1 = 2 = 1 + 1h$ donc $\gamma_0 = \frac{a_0+a_1}{2} = \frac{3}{2}$ d'où

$$Q_1 = h \sum_{i=0}^{i=1-1} f(\gamma_i) = hf(\gamma_0) = f(\frac{3}{2}) = \frac{2}{3}$$

• Si $n = 3$ on a: $h = \frac{2-1}{3} = \frac{1}{3}$, $a_0 = 1$, $a_1 = 1 + 1\frac{1}{3} = \frac{4}{3}$, $a_2 = 1 + 2\frac{1}{3} = \frac{5}{3}$ et $a_3 = 1 + 3\frac{1}{3} = 2$ donc: $\gamma_0 = \frac{a_0+a_1}{2} = \frac{7}{6}$, $\gamma_1 = \frac{a_1+a_2}{2} = \frac{9}{6}$, $\gamma_2 = \frac{a_2+a_3}{2} = \frac{11}{6}$ d'où

$$Q_3 = h \sum_{i=0}^{i=3-1} f(\gamma_i) = h(f(\gamma_0) + f(\gamma_1) + f(\gamma_2)) = \frac{1}{3}(\frac{6}{7} + \frac{6}{9} + \frac{6}{11}) = \frac{478}{693} = 0.68975468$$

• Si $n = 9$ on a: $h = \frac{1}{9}$, $a_0 = 1$, $a_1 = 1 + 1\frac{1}{9} = \frac{10}{9}$, $a_2 = 1 + 2\frac{1}{9} = \frac{11}{9}$, $a_i = 1 + i\frac{1}{9}$ et $a_9 = 2$ donc: $\gamma_0 = \frac{a_0+a_1}{2} = \frac{19}{18}$, $\gamma_1 = \frac{a_1+a_2}{2} = \frac{21}{18}$, $\gamma_i = \frac{a_i+a_{i+1}}{2} = \frac{19+2i}{18}$ d'où

$$\begin{aligned} Q_9 &= h \sum_{i=0}^{i=9-1} f(\gamma_i) = h(f(\gamma_0) + f(\gamma_1) + \ldots + f(\gamma_8)) = \frac{1}{9}(\frac{18}{19} + \frac{18}{21} + \ldots + \frac{18}{19+2i} + \ldots + \frac{18}{35}) \\ &= \frac{14145553414}{20419054425} = 0.69276237 \end{aligned}$$

n	Q_n	$(b-a)\frac{h^2M}{24}$	$\lvert Q_n - Q_{3^n}\rvert$	erreur exacte
1	0.66666667	$8.3\ 10^{-2}$	——-	$-2.7\ 10^{-2}$
3	0.68975468	$4.6\ 10^{-3}$	$2.3\ 10^{-2}$	$-3.4\ 10^{-3}$
9	0.69276237	$5.2\ 10^{-3}$	$3.0\ 10^{-3}$	$-3.9\ 10^{-4}$

5.3 La méthode des trapèzes

5.3.1 La formule élémentaire:

Cette méthode consiste à remplacer la courbe de la fonction f entre α et β par une droite passant par les deux points $(\alpha, f(\alpha))$ et $(\beta, f(\beta)$. Ceci est schématisé dans la figure suivante:

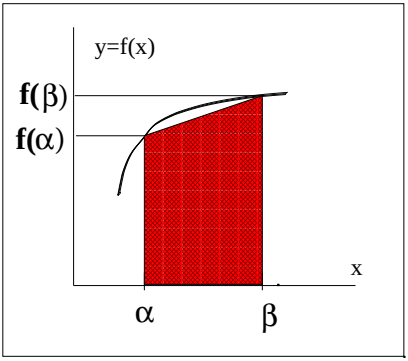

Figure 5.6: Méthode du trapèze

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(t)dt = \frac{h}{2}(f(\alpha) + f(\beta)) + R_{\alpha,\beta}(f)$$

Pour exprimer le reste $R_{\alpha,\beta}(f)$, on suppose que f a une dérivée seconde f" continue sur $[\alpha, \beta]$ et introduisons la fonction auxiliaire $\varphi(x)$ définie par:

$$\varphi(x) = F(\gamma + x) - F(\gamma - x) - x(f(\gamma + x) + f(\gamma - x)) - kx^3, \quad \gamma = \frac{\alpha + \beta}{2} \tag{5.5}$$

k est une constante choisie telle que $\varphi(\frac{h}{2}) = 0$. En exigeant cela on obtient pour k l'expression suivante:

$$k = \frac{F(\beta) - F(\alpha) - \frac{h}{2}(f(\beta) + f(\alpha))}{(h/2)^3}$$

$\varphi(0) = \varphi(h/2) = 0$, d'après le théorème de Rolle il existe $\xi \in]0, h/2[$ telle que $\varphi'(\xi) = 0$, or

$$\varphi'(x) = -x(f'(\gamma + x) - f'(\gamma - x)) - 3kx^2$$

Le théorème des accroissements finis appliqué à f' sur l'intervalle $]\gamma + \xi, \gamma - \xi[$ implique qu'il existe $\eta \in]\gamma + \xi, \gamma - \xi[$ telle que

$$f'(\gamma + \xi) - f'(\gamma - \xi) = 2\xi f''(\eta)$$

comme $\varphi'(\xi) = 0$ on obtient $k = -\frac{2}{3}f''(\eta)$ et comme $\varphi(\frac{h}{2}) = 0 = F(\beta) - F(\alpha) - \frac{h}{2}(f(\beta) + f(\alpha)) + \frac{2}{3}f''(\eta)(\frac{h}{2})^3$, on en déduit:

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(t)dt = \frac{h}{2}(f(\beta) + f(\alpha)) - \frac{h^3}{12}f''(\eta); \qquad \alpha < \eta < \beta$$

c'est la fomule élémentaire pour la méthode des trapèzes.

5.3.2 Formule composée

On suppose que f: $[a,b]$ vers $\mathbb{R}$ a une dérivée seconde continue f''. On considère la subdivision régulière de pas h de $[a,b]$:
$a_0 = a < a_1 < a_2 < \ldots < a_n = b$, sur chaque $[a_i, a_{i+1}]$ on a par application de la formule élémentaire:

$$\int_{a_i}^{a_{i+1}} f(t)dt = \frac{h}{2}(f(a_i) + f(a_{i+1})) - \frac{h^3}{12}f''(\xi_i); \qquad a_i < \xi_i < a_{i+1}$$

sur l'intervalle $[a,b]$ on a donc:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(t)dt &= \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{i=n-1}(f(a_i) + f(a_{i+1}) - \frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{i=n-1} f''(\xi_i) \\ &= \underbrace{h(\frac{f(a)}{2} + \sum_{i=1}^{i=n-1} f(a_i) + \frac{f(b)}{2})}_{T_n(f)} \underbrace{-\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\theta)}_{R_n(f)}\end{aligned}$$

$T_n(f)$ est la valeur approchée de $\int_a^b f(t)dt$. $R_n(f)$ est l'erreur de méthode lorsqu'on approche $\int_a^b f(t)dt$ par $T_n(f)$.
La figure suivante permet de schématiser cette méthode d'approximation:

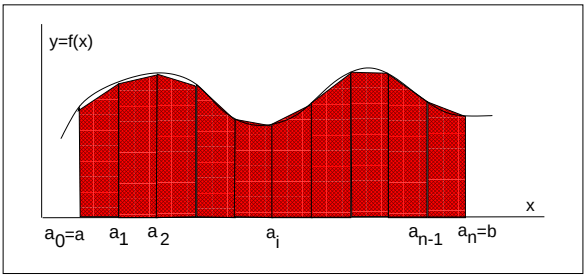

Figure 5.7: Méthode des trapèzes

5.3.3 Propriétés

- si $f'' = 0$ alors $R_n(f) = 0$
- si $f'' > 0$ l'approximation fournit par $T_n(f)$ est par excès.
- si $f'' \geq 0$ et garde le même signe sur un intervalle $[a,b]$ on peut encadrer l'intégrale $\int_a^b f(t)dt$ par:

$$Q_n(f) \leq \int_a^b f(t)dt \leq T_n(f)$$

- la méthode est convergente: la convergence est en $\frac{1}{n^2}$

5.3.4 Estimation de l'erreur

- si f'' est Majorée par M on a: $|R_n(f)| \leq (b-a)\frac{h^2 M}{12}$
- pour limiter le nombre d'évaluations de f, on peut se limiter au cas où n est une puissance de 2, alors dans ce cas $|T_{2^n} - T_n|$ fournit une estimation de l'erreur ainsi qu'un test d'arrêt des itérrations.

5.3.5 Exemple

$Log2 = \int_1^2 \frac{dt}{t} \approx 0.6931471806$

n	T_n	$(b-a)\frac{h^2M}{12}$	$\lvert T_{2^n} - T_n \rvert$	erreur exacte
1	0.75	8.310^{-2}	—-	5.710^{-2}
2	0.7083333	2.110^{-2}	4.710^{-2}	1.510^{-2}
4	0.6970238	5.210^{-3}	1.110^{-2}	3.410^{-3}
8	0.69412183	1.310^{-3}	2.910^{-3}	9.810^{-4}

5.4 Accélération de la convergence : Méthode de Simpson (1710-1761).

5.4.1 Formule élémentaire

Pour établir la formule élémentaire des rectangles et des trapèzes, on a en fait interpolé la fonction f:

- par une droite horizentale (un polynôme de degré 0) dans la méthode des rectangles avec point milieu.
- par une droite (un polynôme de degré 1) dans la méthode des trapèzes.

On peut espèrer améliorer la précision en approchant le graphe de f par l'arc de parabole d'axe vertical, passant par les points $A(\alpha, f(\alpha))$, $B(\beta, f(\beta))$ et $C(\gamma, f(\gamma))$ (avec $\gamma = \frac{\alpha+\beta}{2}$). Ce qui revient à interpoler f en ces points par un plynôme de degré 2.
On montre facilement que le poynôme de degré 2 qui passe par A, B et C est de la forme:

$$\begin{aligned} P(X) &= \frac{(X-\gamma)(X-\beta)}{(\alpha-\gamma)(\alpha-\beta)}f(\alpha) + \frac{(X-\alpha)(X-\beta)}{(\gamma-\alpha)(\gamma-\beta)}f(\gamma) + \frac{(X-\alpha)(X-\gamma)}{(\beta-\alpha)(\beta-\gamma)}f(\beta) \\ &= \frac{2}{h^2}[(X-\gamma)(X-\beta)f(\alpha) - 2(X-\alpha)(X-\beta)f(\gamma) + (X-\alpha)(X-\gamma)f(\beta)] \end{aligned}$$

On a donc $\int_\alpha^\beta P(X)dX = \frac{h}{6}(f(\alpha)+4f(\gamma)+f(\beta))$ on propose donc la formule élémentaire suivante:

$$\int_\alpha^\beta f(t)dt = \frac{h}{6}(f(\alpha)+4f(\gamma)+f(\beta)) + R_{\alpha,\beta}$$

pour exprimer le reste, en est amené à supposer que f a une dérivé quatrième $f^{(4)}$ continue: considèrons la fonction auxiliaire: $\varphi : [0, \frac{h}{2}] \to \mathbb{R}$ définie par

$$\varphi(x) = F(\gamma+x) - F(\gamma-x) - \frac{x}{3}(f(\gamma+x) + f(\gamma-x) + 4f(\gamma)) + kx^5$$

k est une constante choisie telle que: $\varphi(\frac{h}{2}) = 0$.
$\varphi(0) = \varphi(\frac{h}{2}) = 0$, d'après le théorème de Rolle, il existe $\xi_1 \in [0, \frac{h}{2}]$ telle que $\varphi'(\xi_1) = 0$.
D'après l'expression de $\varphi'(x)$ donnée ci dessous

$$\varphi'(x) = \frac{2}{3}(f(\gamma+x) + f(\gamma-x)) - \frac{4}{3}f(\gamma) - \frac{x}{3}(f'(x+\gamma) - f'(\gamma-x)) + 5kx^4$$

on conclut que $\varphi'(0) = 0$, et comme $\varphi'(\xi_1) = 0$ on en déduit du théorème de Rolle qu'il existe $\xi_2 \in [0, \xi_1]$ tellle que $\varphi''(\xi_2) = 0$

$$\varphi^{(2)}(x) = \frac{1}{3}f(\gamma+x) - f(\gamma-x) - \frac{x}{3}(f^{(2)}(x+\gamma) + f^{(2)}(\gamma-x)) + 20kx^3$$

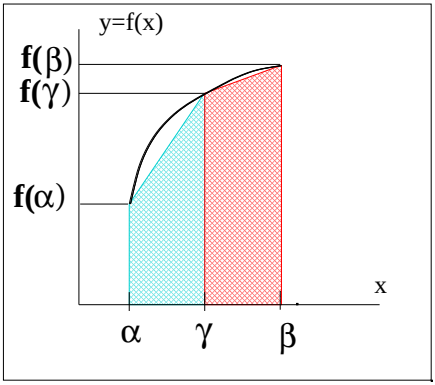

Figure 5.8: Méthode de Simpson

$\varphi^{(2)}(\xi_2) = 0$, $\varphi^{(2)}(0) = 0$; par application du théorème de Rolle de nouveau, il existe $\xi_3 \in [0, \xi_2]$ tellle que $\varphi^{(3)}(\xi_3) = 0$.

Le même procedé appliqué à $\varphi^{(3)}$ donne:

$$\varphi^{(3)}(x) = -\frac{x}{3}(f^{(3)}(x+\gamma) - f^{(3)}(\gamma - x)) + 60kx^2$$

$\varphi^{(3)}(\xi_3) = 0$ implique $\frac{\xi_3}{3}(f^{(3)}(\xi_3+\gamma) - f^{(3)}(\gamma - \xi_3)) = 60k\xi_3^2$

Le théorème des accroissements assure l'existence de $\eta \in]\gamma - \xi_3, \gamma + \xi_3[$ tel que $f^{(3)}(\xi_3+\gamma) - f^{(3)}(\gamma - \xi_3) = 2\xi_3 f^{(4)}(\eta)$

On a donc finalement:

$$k = \frac{1}{90} f^{(4)}(\eta)$$

avec cette valeur de k mise dans l'exprerssion de la fonction auxiliaire φ et en demandant que $\varphi(\frac{h}{2}) = 0$ on en déduit:

$$\int_\alpha^\beta f(t)dt = F(\beta) - F(\alpha) = \frac{h}{6}(f(\beta) + f(\alpha) + 4f(\gamma)) - \frac{h^5}{2880} f^{(4)}(\eta)$$

ceci est la formule élémentaire pour la méthode de Simpson.

5.4.2 Formule composée

On suppose que $f : [a, b]$ vers $\mathbb{R}$ a une dérivée quatrième $f^{(4)}$ continue. On considère une subdivision régulière de pas $h = \frac{b-a}{n}$ de $[a, b]$: $a_0 = a < a_1 < a_2 < ... < a_n = b$
sur chaque intervalle $[a_i, a_{i+1}]$ on a:

$$\int_{a_i}^{a_{i+1}} f(t)dt = F(\beta) - F(\alpha) = \frac{h}{6}(f(a_i) + f(a_{i+1}) + 4f(\frac{a_i + a_{i+1}}{2})) - \frac{h^5}{2880} f^{(4)}(\eta_i)$$

d'où sur $[a, b]$:

$$\int_a^b f(t)dt = \frac{h}{6} \sum_{i=0}^{i=n-1} (f(a_i) + f(a_{i+1}) + 4f(\frac{a_i + a_{i+1}}{2})) - \frac{h^5}{2880} \sum_{i=0}^{i=n-1} f^{(4)}(\eta_i)$$

En appliquant le théorème des valeurs intermediaire au dernier terme du membre de droite: on trouve:

$$\int_a^b f(t)dt = \underbrace{\frac{h}{6}(f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{i=n-1} f(a_i)+4\sum_{i=0}^{i=n-1} f(\frac{a_i+a_{i+1}}{2}))}_{S_n(f)} \quad \underbrace{-\frac{h^4}{2880}(b-a)\sum_{i=0}^{i=n-1} f^{(4)}(\theta)}_{R_n(f)}$$

Le reste $R_n(f)$ représente l'erreur de méthode lorsqu'on remplace $\int_a^b f(t)dt$ par la somme finie $S_n(f)$.

5.4.3 Propriétés

- $R_n(f) = \int_a^b f(t)dt - S_n(f)$
- la méthode est convergente, sa convergence est réglée par le terme en h^4
- $S_n(f) = \frac{1}{3}(2Q_n(f) + T_n(f))$

5.4.4 Estimation de l'erreur.

- En pratique il est difficile d'obtenir une majoration de la dérivée 4ème. Sinon, si M est un majorant de $f^{(4)}$ on a:
$$|R_n(f)| \leq (b-a)\frac{h^4 M}{2880}$$
- Pour limiter le nombre d'évaluations de f, on peut se limiter au cas où n est une puissance de 2. Alors dans ce cas $|S_{2^n} - S_n|$ fournit une estimation de l'erreur ainsi qu'un test d'arrêt des itérations.

5.4.5 Exemple

$\int_1^2 \frac{dt}{t} = ln2 \approx 0.6931471806$, $f'(x) = -\frac{1}{x^2}$, $f''(x) = \frac{2}{x^3}$ $f^{(3)}(x) = \frac{6}{x^4}$ $f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5}$. On remarque donc que $f^{(4)}(x)$ est majorée par 24.

n	nombre de points	S_n	$(b-a)\frac{h^2M}{12}$	$\lvert S_{2^n} - S_n\rvert$	erreur exacte
1	3	0.69444443	8.3 10^{-3}	——	1.2 10^{-3}
2	5	0.69325393	5.2 10^{-4}	1.2 10^{-3}	1.1 10^{-4}
4	9	0.69315450	3.3 10^{-5}	1.1 10^{-4}	7.3 10^{-6}
8	17	0.69314760	2.0 10^{-6}	6.9 10^{-6}	4.2 10^{-7}

5.5 La méthode de Gauss (à deux points)

5.5.1 Principe de la méthode de Gauss à deux points

En établissant la méthode des trapèzes élémentaires:

$$\int_\alpha^\beta f(t)dt = \frac{h}{6}f(\alpha) + h\frac{2}{3}f(\gamma) + \frac{h}{6}f(\beta)$$

on s'est fixé les abscisses α, β et $\gamma = \frac{\alpha+\beta}{2}$ et on a calculé les poids $\frac{h}{6}$, $\frac{2}{3}h$ et $\frac{h}{6}$ de façon à ce que la formule soit exacte pour les polynômes de degré inférieur ou égal à 2.
Alors on peut se poser la question suivante: pourquoi ne pas considèrer les abscisses elles-même

comme des inconnues à déterminer en même temps que les coefficients?
on se limite à 2 abscisses et on propose pour approximation la formule élémentaire suivante:

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(t)dt = \lambda' f(\gamma') + \lambda'' f(\gamma'')$$

où λ', λ'', γ' et γ'' sont à déterminer pour que le reste soit nul si f est un polynôme de degré 0,1, 2 ou 3.
L'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à trois est un espace vectoriel sur $\mathbb{R}$. Il admet comme base la famille $B = (1, t, t^2, t^3)$. Si on exige que la formule élémentaire précédente soit vérifiée pour les polynômes de degré inférieur ou égal à trois elle doit être vérifiée pour chaque élément de la base B. En éxigant cela on obtient les relations suivantes:

$$\begin{aligned}
&\beta - \alpha = \lambda' + \lambda'' \quad \textit{pour} \quad f(t) = 1\\
&\frac{1}{2}(\beta^2 - \alpha^2) = \lambda'\gamma' + \lambda''\gamma'' \quad \textit{pour} \quad f(t) = t\\
&\frac{1}{3}(\beta^3 - \alpha^3) = \lambda'\gamma'^2 + \lambda''\gamma''^2 \quad \textit{pour} \quad f(t) = t^2\\
&\frac{1}{4}(\beta^4 - \alpha^4) = \lambda'\gamma'^3 + \lambda''\gamma''^3 \quad \textit{pour} \quad f(t) = t^3
\end{aligned}$$

pour simplifier les calculs on va établir le résultat pour $\alpha = -1$, $\beta = 1$ et avec un changement de variables approprié on remonte à α et β quelconques. On a donc le système suivant:

$$\begin{cases}
2 = \lambda' + \lambda'' & (1)\\
0 = \lambda'\gamma' + \lambda''\gamma'' & (2)\\
\frac{2}{3} = \lambda'\gamma'^2 + \lambda''\gamma''^2 & (3)\\
0 = \lambda'\gamma'^3 + \lambda''\gamma''^3 & (4)
\end{cases}$$

La résolution de ce système permet d'obtenir la relation suivante:

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = f(-\frac{1}{\sqrt{3}}) + f(\frac{1}{\sqrt{3}})$$

en effectuant le changement de variables $u = \frac{\beta+\alpha}{2} - \frac{\beta-\alpha}{2}t$, la formule precédente devient:

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(t)dt = \frac{\beta-\alpha}{2}[f(\gamma - \frac{h}{2\sqrt{3}}) + f(\gamma + \frac{h}{2\sqrt{3}})]$$

on peut alors prouver la formule élèmentaire de Gauss à deux points:

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(t)dt = \frac{\beta-\alpha}{2}[f(\gamma - \frac{h}{2\sqrt{3}}) + f(\gamma + \frac{h}{2\sqrt{3}})] + \frac{h^5}{4320}f^{(4)}(\theta)$$

pour une subdivision régulière de pas $h = \frac{b-a}{n}$ de $[a, b]$ si γ_i est le milieu de $[a_i, a_{i+1}]$: on a donc la formule composée:

$$\int_{a}^{b} f(t)dt = \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{i=n-1}[f(\gamma_i - \frac{h}{2\sqrt{3}}) + f(\gamma_i + \frac{h}{2\sqrt{3}})] + \frac{h^5}{4320}f^{(4)}(\theta)$$

une estimation de l'erreur est fournie par $|G_{2^n} - G_n|$.

5.5.2 Exemple

$\int_1^2 \frac{dt}{t} = ln2 \approx 0.6931471806$, $f'(x) = -\frac{1}{x^2}$, $f''(x) = \frac{2}{x^3}$ $f^{(3)}(x) = \frac{6}{x^4}$ $f^{(4)}(x) = \frac{24}{x^5}$. On remarque donc que $f^{(4)}(x)$ est majorée par 24.

n	nombre de points	G_n	$(b-a)\frac{h^2M}{12}$	$\lvert G_{2^n} - G_n \rvert$	erreur exacte
1	2	0.69230769	$5.6\ 10^{-3}$	——	$-8.4\ 10^{-4}$
2	4	0.69307663	$3.5\ 10^{-4}$	$7.7\ 10^{-4}$	$-7.1\ 10^{-5}$
4	8	0.69314227	$2.2\ 10^{-5}$	$6.6\ 10^{-5}$	$-4.9\ 10^{-6}$
8	16	0.69314681	$1.3\ 10^{-6}$	$4.6\ 10^{-6}$	$-4\ 10^{-7}$

5.6 Formule de quadrature

5.6.1 Préliminaire et exemples

Comme nous l'avons signaler au début, la plupart des algorithmes numériques procèdent comme suit: on subdivise $[a, b]$ en plusieurs sous-intervalles ($a = x_0$ ¡ x_1 ¡ x_2 ¡ $\ldots$ ¡ $x_n = b$) et on utilise le fait que:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$$

De cette manière, on est ramené au calcul de plusieurs intégrales pour lesquelles la longueur de l'intevalle est relativement petite. Si on s'interesse par exemple à: $I_j = \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$, on posons $x = x_j + th_j$ avec $h_j = x_{j+1} - x_j$, l'intégrale I_j devient:

$$I_j = \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx = h_j \int_0^1 f(x_j + jh_j)dt$$

Notons enfin que $g(t) = f(x_j + jh_j)$. Il reste alors à calculer une approximation de:

$$\int_0^1 g(t)dt$$

Exemples:

- Dans le cas de la formule du rectangle avec point milieu, on a

$$\int_0^1 g(t)dt \approx g(\frac{1}{2})$$

- Dans le cas de la formule du trapèze:

$$\int_0^1 g(t)dt \approx \frac{1}{2}[g(0) + g(1)]$$

- Dans le cas de la formule de Simpson:

$$\int_0^1 g(t)dt \approx \frac{1}{6}[g(0) + 4g(\frac{1}{2}) + g(1)]$$

5.6.2 Définitions

Définition de la formule de quadrature: Une *formule de quadrature* à **s étages** est donnée par:

$$\int_0^1 g(t)dt \approx \sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i). \tag{5.6}$$

Les c_i sont les nœuds de la formule de quadrature et les b_i sont les poids.

Exemples:

- la formule du rectangle avec point milieu $\int_0^1 g(t)dt \approx g(\frac{1}{2})$ est à un seul étage $s = 1$ le nœud $c_1 = \frac{1}{2}$ et le poids $b_1 = 1$.
- la formule du trapèze $\int_0^1 g(t)dt \approx \frac{1}{2}g(0) + \frac{1}{2}g(1)$ est à deux étages $s = 2$. Les nœuds $c_1 = 0$ et $c_2 = 1$, les poids $b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$.
- la formule de Simpson: $\int_0^1 g(t)dt \approx \frac{1}{6}g(0) + \frac{4}{6}g(\frac{1}{2}) + \frac{1}{6}g(1)$ est à trois étages $s = 3$. Les nœuds $c_1 = 0$, $c_2 = \frac{1}{2}$ et $c_3 = 1$, les poids $b_1 = b_3 = \frac{1}{6}$ et $b_2 = \frac{4}{6}$.

5.6.3 Ordre de la méthode

Définition de l'ordre de la formule de quadrature: On dit que p est *l'ordre* de la formule de quadrature (5.6) s'elle est exacte pour tous les polynômes de degré $p - 1$, c'est à dire:

$$\int_0^1 g(t)dt = \sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i) \qquad \text{pour} \qquad \deg g \leq p - 1 \tag{5.7}$$

On voit que la formule du rectangle avec point milieu et du trapèze sont d'ordre 2. La formule de Simpson est d'ordre 4.

Théorème: La formule de quadrature (5.6) a un ordre p si et seulement si les p conditions suivantes sont vérifiées:

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q} \qquad \text{pour} \qquad q = 1, 2, \ldots, p \tag{5.8}$$

Preuve:
$\rightarrow$ la formule (5.7) appliquée successivement à $(g(t) = t^{q-1})_{(q=1,2,\ldots,p)}$ donne:

$$\int_0^1 q^{q-1}dq = \frac{1}{q} = \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{q-1}$$

La réciproque découle du fait qu'un polynôme de degré $p - 1$ est une combinaison de linéaire de 1, t, t^2,..., t^{p-1} c.à.d $g(t) = \alpha_1 + \alpha_2 t + \alpha_3 t^2 + \ldots + \alpha_p t^{p-1}$ et que l'intégrale $\int_0^1 g(t)dt$ ainsi que l'expression $\sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i)$ sont linéaire en g. Par application de la formule (5.8) pour $q = 1, 2, \ldots, p$ on obtient p équations. En multipliant l'équation $q = 1$ par α_1, l'équation $q = 2$ par α_2, ..., l'équation $q = p$ par α_p et en faisant la somme terme par terme on trouve:

$$\alpha_1 1 + \alpha_2 \frac{1}{2} + \ldots + \alpha_p \frac{1}{p} = \alpha_1 \int_0^1 1dt + \alpha_2 \int_0^1 tdt + \ldots + \alpha_p \int_0^1 t^{p-1}dt =$$
$$= \int_0^1 g(t)dt =$$

$$\alpha_1[\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{1-1}] + \alpha_2[\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{2-1}] + \ldots + \alpha_p[\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{p-1}] =$$
$$\sum_{i=1}^{s} b_i[\alpha_1 + \alpha_2 c_i + \ldots + \alpha_p c_i^{p-1}] =$$
$$= \sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i)$$

ce qu'il fallait démontrer.

Remarque:

Détermination des poids b_i de la formule de quadrature.
En fixant les nœuds $c_1, \ldots, c_s \in [0,1]$ (distincts), la condition (5.8) avec $p = s$ représente un système linéaire pour $b_1, \ldots, b_s$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ c_1 & c_2 & \ldots & c_s \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_1^{s-1} & c_2^{s-1} & \ldots & c_s^{s-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \vdots \\ \frac{1}{s} \end{pmatrix} \tag{5.9}$$

La matrice dans (5.9) est une matrice de Vandermonde, les c_i sont distincts alors son determinant est non nul. Le système admet donc une solution unique. Ceci nous donne une formule de quadrature d'ordre $p = s$.

cas ou les c_i sont équidistants:

- $s = 2$ donc $c_1 = 0$ et $c_2 = 1$ on a alors le système 2×2 suivant:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

  ce qui donne $b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$, la formule de quadrature correspondante est la formule du trapèze: $\int_0^1 g(t)dt = \frac{1}{2}g(0) + \frac{1}{2}g(1)$.

- $s = 3$ on a $c_1 = 0$, $c_2 = \frac{1}{2}$ et $c_3 = 1$, alors le système 3×3 suivant:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \\ 0 & (\frac{1}{2})^2 & 1^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

  ce qui donne $b_1 = b_3 = \frac{1}{6}$ et $b_2 = \frac{4}{6}$, la formule de quadrature correspondante est la formule de Simpson: $\int_0^1 g(t)dt = \frac{1}{6}g(0) + \frac{4}{6}g(\frac{1}{2}) + \frac{1}{6}g(1)$.

- $s = 4$ on a $c_1 = 0$, $c_2 = \frac{1}{3}$, $c_3 = \frac{2}{3}$ et $c_4 = 1$, alors le système 4×4 suivant:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 1 \\ 0 & (\frac{1}{3})^2 & (\frac{2}{3})^2 & (1)^2 \\ 0 & (\frac{1}{3})^3 & (\frac{2}{3})^3 & (1)^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

ce qui donne $b_1 = b_4 = \frac{1}{8}$ et $b_2 = b_3 = \frac{3}{8}$, la formule de quadrature correspondante est la formule de Newton:

$$\int_0^1 g(t)dt = \frac{1}{8}g(0) + \frac{3}{8}g(\frac{1}{3}) + \frac{3}{8}g(\frac{2}{3}) + \frac{1}{8}g(1)$$

On vérifie facilement que la formule de Newton est d'ordre 4.

- pour $s = 5$ on a: $c_1 = 0$, $c_2 = \frac{1}{4}$, $c_3 = \frac{2}{4}$, $c_4 = \frac{3}{4}$, $c_5 = 1$, le système 5×5 correspondant admet comme solution: $b_1 = b_5 = \frac{7}{90}$, $b_2 = b_4 = \frac{32}{90}$ et $b_3 = \frac{12}{90}$. La formule de quadrature correspondante est la formule de Boole et est d'ordre 6.

$$\int_0^1 g(t)dt = \frac{7}{90}g(0) + \frac{32}{90}g(\frac{1}{4}) + \frac{12}{90}g(\frac{2}{4}) + \frac{32}{90}g(\frac{3}{4}) + \frac{7}{90}g(1)$$

.

5.7 Dérivation numérique

Dans cette partie nous abordons le problème d'approximation de la dérivée d'ordre k de f en un point x_0 donné: $f^{(k)}(x_0)$, $k = 1, 2 \ldots$. Nous allons voir que si l'on connais les valeurs prises par f en un certain nombre de points $x_i = x_0 + ih$, $i = 1, 2, \ldots$ il est possible de trouver une approximation de $f^{(k)}(x_0)$. Dans ce qui suit, nous supposons que f est suffisament dérivable au voisinage de x_0.

5.7.1 Approximation polynômiale

Dans le chapitre précedent, nous avons montré que toute fonction $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, $f \in C^{(n+1)}[a, b]$, si $x_0 \in [a, b]$ (un point fixe), alors pour tout $x \in [a, b]$, il existe un élément c entre x_0 et x tel que

$$f(x) = P_n(x) + E_n(x) \tag{5.10}$$

$$P_n(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \tag{5.11}$$

$$E_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1} \tag{5.12}$$

P_n est le polynôme qui peut être utilisé comme approximation de f, $E_n(x)$ est l'erreur commise lors de cette approximation. Si on se limite au cas ou $n = 1$ on aura:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f^{(2)}(c)}{(2)!}(x - x_0)^2 \tag{5.13}$$

La quantité, $f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ n'est rien d'autre que l'équation de la tangente de f au voisinage de x_0. Dans ce voisinage, la droite $f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ est une bonne approximation de $f(x)$. Cette approximation est d'autant meilleure que x est très voisin de x_0, c'est à dire que: $\Delta x = x - x_0$ est petit et donc l'erreur est d'ordre Δx^2.

5.7.2 Approximation de la dérivée première

A partir du développement de Taylor (5.13), on est en mesure de donner une approximation de la *dérivée première* de f en x_0:

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2}\frac{d^2 f}{dx^2}(c) \tag{5.14}$$

L'approximation de la dérivée première est donc donnée par:

$$f'_+(x_0) = \frac{df}{dx}(x_0) \approx \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \tag{5.15}$$

cette approximation est appelée **différence finie progressive (où avancée)**. Si on remplace Δx par $-\Delta x$ dans (5.14) on obtient:

$$\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{f(x_0-\Delta x) - f(x_0)}{-\Delta x} + \frac{\Delta x}{2}\frac{d^2f}{dx^2}(\bar{c}) \tag{5.16}$$

de l'équation (5.16), on obtient l'approximation suivante de la dérivée:

$$f'_-(x_0) = \frac{df}{dx}(x_0) \approx \frac{f(x_0-\Delta x) - f(x_0)}{-\Delta x} \tag{5.17}$$

cette approximation est appelé **différence finie rétrograde (où arrière)**.
Dans les deux cas d'approximation (différence finie progressive ou rétrograde), on remarque que l'erreur est d'ordre $\mathcal{O}(\Delta x)$ et est *approximativement* la même dans les deux cas.

Pour obtenir une approximation plus précise de la dérivée $\frac{df}{dx}(x_0)$, on peut faire la moyenne des approximations progressive et rétrograde. En effet, en faisant la somme des équations (5.14) et (5.16) on a:

$$2\frac{df}{dx}(x_0) = \frac{f(x_0-\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2}[\frac{d^2f}{dx^2}(\bar{c}) - \frac{d^2f}{dx^2}(c)] \tag{5.18}$$

puisque $x_0 < c < x_0 + \Delta x$, $x_0 - \Delta x < \bar{c} < x_0$ et Δx est petit, donc c et proche de $\bar{c}$ et par suite la différence $\frac{d^2f}{dx^2}(\bar{c}) - \frac{d^2f}{dx^2}(c)$ tend vers zéro. On conclut que l'erreur dans (5.18) est beaucoup plus petite que $\mathcal{O}(\Delta x)$. Pour calculer l'erreur dans ce cas on procéde comme suit: On utilise le développement de Taylor à l'ordre 3 de $f(x_0+\Delta x)$ et $f(x_0-\Delta x)$:

$$f(x_0+\Delta x) = f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + \frac{(\Delta x)^2}{2!}f^{(2)}(x_0) + \frac{(\Delta x)^3}{3!}f^{(3)}(x_0) + \dots \tag{5.19}$$

$$f(x_0-\Delta x) = f(x_0) - \Delta x f'(x_0) + \frac{(\Delta x)^2}{2!}f^{(2)}(x_0) - \frac{(\Delta x)^3}{3!}f^{(3)}(x_0) + \dots \tag{5.20}$$

En faisant la différence de (5.19) et (5.20) on obtient:

$$f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x) = 2\Delta x f'(x_0) + \frac{2(\Delta x)^3}{3!}f^{(3)}(x_0) + \dots \tag{5.21}$$

On pourra montrer que (démonstration à titre d'exercice):

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} - \frac{(\Delta x)^2}{6}f^{(3)}(\xi) \tag{5.22}$$

ceci conduit à l'approximation suivante:

$$f'_\pm(x_0) = f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} \tag{5.23}$$

appelée **différence finie centrée**. Comme nous allons le voir dans un exemple explicite, la différence finie centrée est plus precise que la différence finie progressive et rétrograde. Ceci est prévisible du fait que l'erreur est d'ordre $\mathcal{O}(\Delta x)^2$ dans le cas de la différence centrée. Dans les trois cas que nous avons considèré (progressive, rétrograde et centrée) le nombre d'évaluation de la fonction f est égal à deux.

Exemple

Considèrons la fonction $f(x) = \log(x)$, on cherche à approcher $f'(x_0 = 1)$ en utilisant $\Delta x = 0.1$. Le calcul exact de $f'(1)$ donne $f'(1) = 1$.
• A partir de l'approximation différence progressive on a:
$f'_+(x_0 = 1) \approx (f(x_0 + \Delta x = 1.1) - f(x_0 = 1))/(\Delta x) \approx 0.953102$, l'erreur de cette approximation est de l'ordre:
$E_2 \approx |\frac{\Delta x}{2} f^{(2)}(1)| \approx 0.05$.
• Dans le cas de différence arrière on a:
$f'_-(x_0 = 1) \approx (f(x_0 - \Delta x = 1.1) - f(x_0 = 1))/(-\Delta x) \approx 1.053605$.
• L'approximation de différence centrée donne:
$f'_\pm(x_0 = 1) \approx (f(x_0 + \Delta x = 1.1) - f(x_0 - \Delta x = 0.9))/(2\Delta x) \approx 1.00335$, l'erreur dans ce cas est de l'ordre:
$E_3 \approx |\frac{(\Delta x)^2}{6} f^{(3)}(1)| \approx 0.00333$.
Dans cet exemple, on voit clairement que la différence centrée donne une meilleure approximation avec une erreur de l'ordre de 10^{-3}.

5.7.3 Approximation de la dérivée seconde

La somme des équations (5.19) et (5.20) donne:

$$f(x_0 + \Delta x) + f(x_0 - \Delta x) = 2f(x_0) + (\Delta x)^2 f''(x_0) + 2\frac{(\Delta x)^4}{4!} f^{(4)}(x_0) + \dots \tag{5.24}$$

On peut démontrer le résultat suivant (démonstration a titre d'exercice):

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{(\Delta x)^2} - \frac{(\Delta x)^2}{12} f^{(4)}(\xi) \tag{5.25}$$

Ceci nous conduit à la formule d'approximation de la dérivée seconde:

$$f''_\pm(x_0) = f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \tag{5.26}$$

appelée différence finie centrée, cette appelation est dû au fait que l'approximation (5.26) peut être obtenu en appliquant deux fois la différence centrée (5.23) de la dérivée première.
La différence centrée de la dérivée seconde nécessite trois fois l'évaluation de la fonction f: $f(x_0 + \Delta x)$, $f(x_0)$ et $f(x_0 - \Delta x)$. Les **poids** respectifs: $\frac{1}{(\Delta x)^2}$, -$\frac{2}{(\Delta x)^2}$ et $\frac{1}{(\Delta x)^2}$ sont illustrés sur la **figure 4.9**. En fait, dans toutes les formules d'approximation considèrées la somme des poids doit être zéro.

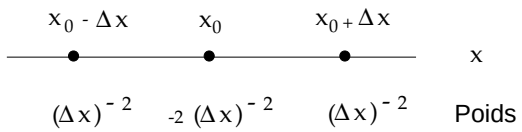

Figure 5.9: Approximation de la dérivée seconde.

5.7.4 Approximation des dérivées partielles

Considèrons une fonction à $u(x, y)$ deux variables x et $y \in \mathbb{R}$. Supposant que f admet des derivées partielles de tout ordre au voisinge de (x_0, y_0). $\frac{\partial u}{\partial x}$ (resp $\frac{\partial u}{\partial y}$) n'est rien d'autre que la dérivée ordinaire de u par rapport à x (resp y) en gardant y (resp x constant). On pourra donc utiliser la

formule de différence avancée, rétrograde ou centrée pour trouver une approximation de $\frac{\partial u}{\partial x}$ et/ou $\frac{\partial u}{\partial y}$. D'après la formule de différence centrée on a:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0) \approx= \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0 - \Delta x, y_0)}{2\Delta x} \tag{5.27}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_0, y_0) \approx= \frac{u(x_0, y_0 + \Delta y) - u(x_0, y_0 - \Delta y)}{2\Delta y} \tag{5.28}$$

Les deux points d'évaluation de la fonction u sont représentés sur la figure suivante:

En physique on a souvent besoin d'évaluer le Laplacien $\nabla^2 u$. A deux dimension $\nabla^2 u$ est donné par:

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

En utilisant la différence centrée pour $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ et $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ (5.26), on montre que $\nabla^2 u$ est approché par:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u(x_0, y_0) \quad \approx \quad & \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - 2u(x_0, y_0) + u(x_0 - \Delta x, y_0)}{(\Delta x)^2} + \\ & \frac{u(x_0, y_0 + \Delta y) - 2u(x_0, y_0) + u(x_0, y_0 - \Delta y)}{(\Delta y)^2} \end{aligned} \tag{5.29}$$

L'approximation de $\nabla^2 u$ nécessite cinq évaluation de u (voir figure), l'erreur de cette approximation est de l'ordre $\max(\mathcal{O}(\Delta x)^2, \mathcal{O}(\Delta y)^2)$. En pratique, on utilise souvent $\Delta x = \Delta y$, dans ce cas $\nabla^2 u$ devient:

$$\begin{aligned} & \nabla^2 u(x_0, y_0) \approx \\ & \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) + u(x_0 - \Delta x, y_0) + u(x_0, y_0 + \Delta y) - 4u(x_0, y_0) + u(x_0, y_0 - \Delta y)}{(\Delta x)^2} \end{aligned} \tag{5.30}$$

Comme il se doit,la somme des poids relatifs est égale à zéro.

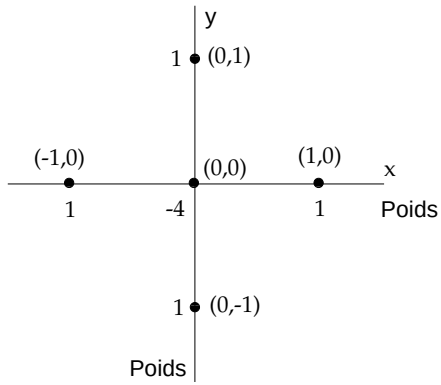

Figure 5.10: Approximation du Laplacien.

5.8 Exercices

Exercice 1. Reprendre la formule du trapèze établie dans le cours, considerer la subdivision regulière $(a_i)_{\{i=0,\dots 2n\}}$ où $a_i = a + i\frac{b-a}{2n}$. Calculer T_{2n} en fonction de T_n. Conclure que lorsque T_n est connu, les T_{2n} et T_{n+1} necessitent le même nombre d'évaluations de la fonction f. Montrer que le lien entre la formule de Simpson et celle des trapèzes est donné par
$S_n = \frac{1}{3}(4T_{2n} - T_n)$.
Exercice 2. On veut calculer $\pi = 4\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ avec une incertitude absolue de 10^{-2}. On approche l'intégrale par les méthodes des rectangles avec point milieu, des trapèzes, de Simpson, de Gauss à deux points. En combien de sous–intervalles faut-il subdiviser $[0,1]$ dans chaque cas pour avoir l'incertitude désirée sur π?
Faire effectivement le calcul par une méthode. On donne les renseignements suivants:

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2} \quad , \quad f'(x) = -2xf^2(x)$$
$$f''(x) = 2(3x^2-1)f^3(x) \quad , \quad f^{(3)} = 24x(1-x^2)f^4(x)$$
$$f^{(4)} = 24(5x^4-10x^2+1)f^5(x) \quad , \quad f^{(5)} = 240x(-3x^4+10x^2-3)f^6(x)$$

Exercice 3 Calculer une primitive de $f(t) = \sqrt{1+t^2}$. En déduire $I = \int_0^1 f(t)dt$.
Calculer I à 10^{-2} près par la méthode des rectangles avec points milieu et par la méthode des trapèzes.
Améliorer la précision sur I à partir des deux approximations précédentes. on donne:

$$f'(x) = x/f(x) \quad , \quad f''(x) = 1/f^3(x)$$
$$f^{(3)} = -3x/f^5(x) \quad , \quad f^{(4)} = 3(4x^2-1)/f^7(x)$$
$$f^{(5)} = 15x(3-4x^2)/f^9(x)$$

Exercice 4. Quelle méthode proposerier–vous pour calculer: $I = \int_0^1 \frac{4}{15}|x-0.693471806|^{\frac{5}{2}}dx$ à 10^{-6} près
Exercice 5. La formule des trapèzes élémentaire pour l'approximation de l'intégrale $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$ par:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_1))$$

Montrer que l'erreur $R = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx - \frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_1))$ lorsque f est deux fois continuement dérivable a pour expression $R = \frac{h^3}{12}f''(\xi)$ où $\xi \in [x_0, x_1]$
On pourra proceder de la manière suivante:
Introduire la fonction auxiliaire $R(h) = \int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx - \frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_0+h))$. On remarque que calculer $R(0)$, $R'(h)$, $R''(h)$ et $R'(0)$.
On rappelle la formule de Taylor avec reste intégrale pour une fonction de lasse C^2: $g(x+t) = g(x) + tg'(x) + \int_x^{x+t}(x+t-\theta)g''(\theta)d\theta$.
Exercice 6. Soit f une fonction de classe C^∞ sur $I \subset \mathbb{R}$. On considère $I(f) = \int_0^h f(t)dt$ que l'on désire approcher par

$$J(f) = h(af(0) + bf(\frac{2h}{3})$$

1. Déterminer a et b pour que la formule approchée $J(f)$ soit de degré de précision le plus élevé possible.
2. Calculer $\int_0^1 \frac{dx}{(1-x)^{1/2}}$ (h=1)
Si $f(x) = \frac{dx}{(1-x)^{1/2}}$ comparer $I(f)$ et $J(f)$.
Exercice 7. Soit g une fonction de classe C^4.

a. Determiner le polynôme d'interpolation de Lagrange P_2 passant par $(0, g(0))$, $(1, g(1))$ et $(2, g(2))$
b. Trouver les constantes α_0, α_1 et α_2 tels que la formule d'intégration:

$$\int_0^2 g(t)dt = \alpha_0 g(0) + \alpha_1 g(1) + \alpha_2 g(2) \tag{5.31}$$

soit exacte pour les polynômes de degré ≤ 2.
c. Vérifier que (1) est exacte pour P_2
d. On posant $g(t) = f(x_0 + \frac{h}{2}t)$ et en utilisant un changement de variables judicieusement choisit retrouver à partir de (5.31) la formule d'intégration élémentaire de Simpson sur l'intervalle $[x_0, x_1]$.
Exercice 8. Soit la formule d'intégration suivante:

$$\int_0^1 f(x)dx = w_0 f(0) + w_b f(b) \quad , \quad b \in [0,1]$$

a) Déterminer w_0 et w_b en fonction de b pour que cette formule soit exacte pour les polynômes de degré ≤ 1.
b) Déterminer b pour que cette formule soit exacte pour les polynômes de degré ≤ 2.
c) Soit $h \in [0,1]$, En déduire à partir de a) et b) que la formule d'intégration suivante:

$$\int_0^h f(x) = \frac{h}{4} f(0) + \frac{3h}{4} f(\frac{2}{3}h)$$

est exacte pour les polynômes de degré ≤ 2.
Exercice 9. On veut calculer $\sqrt{2} = 2\int_0^{\frac{\pi}{4}} cosxdx$ avec une incertitude absolue de 10^{-3}. En utilisant la méthodes des rectangles avec point milieu, des trapèzes, de Simpson et celle de Gauss, determiner le pas de la subdivision regulière qu'il faut utiliser sur $[0, \frac{\pi}{4}]$ pour avoir la précision désirée.
En appliquant la méthode de Gauss, donner la valeur de $\sqrt{2}$ à 10^{-3}.

Exercice 10: *Méthodes des rectangles à gauche.*
Soit $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ telle que f' existe et soit continue; soit $\alpha < \beta$ ans $[a,b]$.
a. Quelle est la formule d'intégration élémentaire suggérée par la figure (a)?

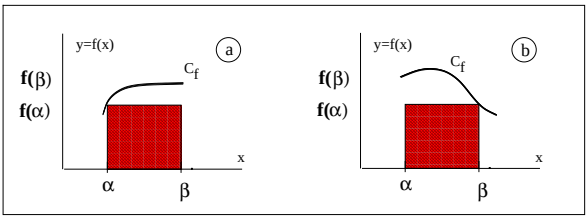

Figure 5.11: Méthodes des rectangles à gauche figure (a) et à droite figure (b).

Quelle est l'erreur élémentaire?
b. Soit $a_0 = a < a_1 < a_2 < \ldots < a_n = b$ une subdivision régulière de pas $h = \frac{b-a}{n}$ de $[a,b]$. Quelle est la formule d'intégration composée obtenue en répétant la formule simple sur chaque intervalle $[a_i, a_{i+1}]$? Erreur de méthode? Que dire de l'approximation si f est monotone sur $[a,b]$? Justifier vôtre réponse.
c. Application au calcul de $\int_1^2 \frac{dx}{x}$. Calculer n pour que l'erreur de méthode soit inférieur à 10^{-3}.
d. Reprendre les mêmes questions dans le cas de la figure (b).

Exercice 11.

On désire calculer $\ln 2 = \int_0^1 \frac{dt}{1+t}$ avec une incertitude absolue de 10^{-2}.
En utilisant la méthode des rectangles avec point milieu, des trapèzes et de Simpson déterminer le pas de la subdivision regulière qu'il faut utiliser sur $[0,1]$ pour avoir la précision désirée.
En appliquant la méthode de Simpson, donner la valeur de $\ln 2$ à 10^{-2}.

Exercice 12.
Soit f une fonction de classe $C^2[a,b]$, on pose $\gamma = \frac{a+b}{2}$.
1. Ecrire le polynôme d'interpolation de Lagrange $P_L(t)$ passant par les points $A_0 = (a, f(a))$, $A_1 = (\gamma, f(\gamma))$ et $A_2 = (b, f(b))$.
2. Montrer que:

$$\int_a^b P_L(t)dt = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\gamma) + f(b)]$$

3. On considère la formule d'intégration suivante:

$$\int_{-1}^1 f(t)dt = a_1 f(-1) + a_2 f(0) + a_3 f(1) + R(f) \tag{5.32}$$

$R(f)$ étant le reste. Determiner a_1, a_2 et a_3 pour que la fomule d'intégration (5.32) soit exacte pour les polynomes de degrés ≤ 2.
4. Pour les valeurs de a_1, a_2 et a_3 trouvées dans **3**, la formule d'intégration (5.32) est elle exacte pour les polynômes de degrés ≤ 3.
5. A l'aide d'un changement de variable, retrouver à partir de (5.32) la formule de Simpson:

$$\int_a^b f(t)dt = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\gamma) + f(b)]$$

Exercice 13.
Soit f une fonction de classe C^2 sur $[a,b]$, soit $[\alpha, \beta]$ un intervalle élémentaire contenu dans $[a,b]$.
a) Déterminer le polynôme de Lagrange $P(X)$ interpolant f aux points d'abscisses α et β.
b) Donner et sans le démontrer l'expression de $f(x) - P(x)$ en fonction de x, α, β et f''.
c) En déduire de b) la formule élémentaire d'intégration des trapèzes.
d) Soit $(a_i)_{i=0,\ldots,n}$ une subdivision régulière de $[a,b]$ de pas $h = (b-a)/n$. Retrouver la formule des trapèzes composée à partir de c).

Exercice 14:

On définit la fonction $g(x) = \frac{1}{1-x}$. Calculer

$$F(x) = \int_0^x g(t)dt, \qquad x < 1$$

a.) Quelle est la valeur de F(x) en $x = \frac{2}{3}$

b.) Donner le degré et l'expression du Polynôme de Lagrange qui interpole $g(x)$ aux points 0, $\frac{1}{3}$, $\frac{2}{3}$.

c.) Trouver des coefficients c_0, c_1 et c_2 tels que pour tout polynôme P de degré inférieur ou égal à 2, on ait

$$\int_o^2 P(x)dx = c_0 P(0) + c_1 P(1) + c_2 P(2)$$

d.) En utilisant un changement de variable, déduire de la formule précédente les coefficients d_0, d_1 et d_2 tels que pour tout polynôme Q de degré inférieur ou égal à 2, on ait

$$\int_0^{\frac{2}{3}} Q(x)dx = d_0 Q(0) + d_1 Q(\frac{1}{3}) + d_2 Q(\frac{2}{3})$$

e.) Utiliser cette formule pour donner une valeur approchée de ln3.
Quel est l'ordre de cette méthode?

ETUSUP.com

Programmation
Cours
Informatique
Optique
Chimie
Algébre
Travaux Pratiques
Electricité
Physique
Résumés
Corrigés
Mathématiques
Analyse
Diapo
Exercices
Livres
Contrôles Continus
Langues
MTU
Mécanique
Thermodynamique
Multimedia
Divers
Economie
Travaux Dirigés
Droit
Chimie Organique

et encore plus..